

Rh(III)モノヒドリド錯体を触媒とした不斉水素化反応の反応経路探索

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 長江春樹

目的 新規に合成を行ったRh(III)不斉水素化錯体触媒の立体構造に関する評価と、反応機構に関する知見を得る。

内容 Gaussian 09 を利用してRh(III)錯体の構造最適化ならびに官能基を持たないオレフィンの不斉水素化反応について反応経路探索を行った。

結果 想定される中間体の構造最適化を完了し、想定される遷移状態についてはいくつかを残して計算が完了した。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ

VCC

7000時間
50GB

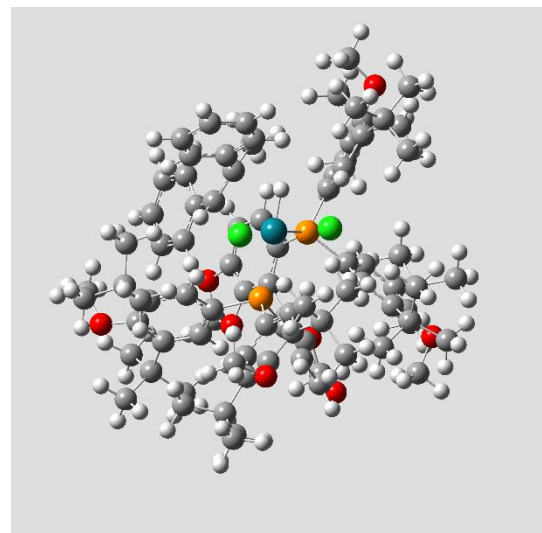


図1：シミュレーション結果